

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. В последние годы во многих странах (России, США, Канаде, Германии, Японии, Китае) проводятся интенсивные экспериментальные и теоретические исследования по изготовлению и изучению каталитической активности нанокластеров металлов строго определенного размера. Важной особенностью малых кластеров металлов является немасштабируемый режим – с изменением размера частиц их каталитическая активность существенно изменяется. Один из важнейших катализаторов, используемый в современной химической промышленности – платина, успешно применяется в виде малых частиц – нано- и субнано-кластеров на оксидной подложке давно. Однако лишь недавно современные нанотехнологические методы приготовления хорошо структурированных кластеров платины как на подложке, так и свободных нейтральных кластеров платины и их ионов, предоставили возможность непосредственного изучения их реакций с малыми органическими молекулами. Важное значение приобретает использование квантово-химических методов для изучения строения и каталитической активности кластеров платины с целью интерпретации и дополнения результатов эксперимента. Моделирование кластеров переходных металлов является сейчас интенсивно развивающейся областью теоретических и экспериментальных исследований. Большое внимание уделяется структурной эволюции кластеров, методам поиска наиболее стабильных изомеров кластеров (глобальных минимумов) и механизмам химических реакций с их участием.

Вместе с тем, не смотря на большое число опубликованных работ, детального исследования структуры нейтральных, катионных, анионных кластеров платины, изучения на них механизма дегидрирования метана, а так же реакции образования этана из двух молекул метана в зависимости от размера, строения кластера и наличия подложки в рамках одного метода до настоящего времени не проводилось.

Целью настоящей работы является выявление основных закономерностей механизмов каталитических превращений метана на нанокластерах платины по данным квантово-химических расчетов.

В качестве **объектов исследования** были выбраны кластеры платины $Pt_{2-9,14}$ различного строения. Модельной реакцией являлся процесс взаимодействия кластеров платины с молекулой метана, как простейшего представителя углеводородов.

Конкретные задачи включают в себя:

1. Определение наиболее энергетически выгодных нейтральных, катионных и анионных кластеров платины различного строения.
2. Изучение влияния адсорбции молекулы водорода на структуру кластеров платины.
3. Изучение механизмов дегидрирования метана на нейтральных, катионных и анионных кластерах платины Pt_{2-5} .
4. Исследование механизма конверсии метана в этан на нейтральных кластерах Pt_4 , Pt_6 (с подложкой Al_6O_9 и без неё), а так же на кластерах Pt_{14} .